

На правах рукописи

АНДРЕЕВ Алексей Иванович

**ДИНАМИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ
ВОСПРИИМЧИВОСТЬ t-J-V-МОДЕЛИ.
СОПОСТАВЛЕНИЕ С ДАННЫМИ ПО
РАССЕЯНИЮ НЕЙТРОНОВ В
 $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ И $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного
состояния

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань– 2009

Работа выполнена в Казанском государственном университете

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Ерёмин Михаил Васильевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Барабанов Александр
Фёдорович

доктор физико-математических наук,
профессор Царевский Сергей
Леонидович

Ведущая организация: Институт физики им. Л. В. Киренского СО
РАН, г. Красноярск, Академгородок

Защита диссертации состоится «17» сентября 2009 г. в 14³⁰ часов
на заседании диссертационного совета Д 212.081.15 в Казанском госу-
дарственном университете по адресу: 420008, Казань, ул. Кремлёвская,
д. 18.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Казанско-
го государственного университета.

Автореферат разослан «__» _____ 200__ г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических
наук, профессор



Ерёмин М.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Открытие в 1986-87 годах нового класса материалов, способных проводить электрический ток без сопротивления при температуре жидкого азота, положило начало новой эры исследований по сверхпроводимости. Большинство известных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) являются слоистыми медно-оксидными соединениями. Накоплено достаточно много экспериментальных данных по их физическим свойствам, особенно много публикаций по дырочно-допированным типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и электронно-допированным типа $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ соединениям. Фазовая диаграмма этих ВТСП довольно богата. При малых индексах допирования они относятся к классу квазидвумерных антиферромагнетиков. Температурный ход магнитной восприимчивости в парамагнитной фазе подчиняется закону Кюри-Вейсса. При больших индексах допирования – это металлы с парамагнетизмом Паули-Ландау.

Описание магнетизма переходной области диэлектрик - металл – одна из актуальных задач физики [1-3]. Базовой моделью для описания двойственного характера магнетизма в этих соединениях считается t - J модель, которая может быть получена из модели Хаббарда в предельном случае $U \gg zt$. U - параметр кулоновского отталкивания электронов на одном узле, t интеграл перескока электрона (допированной дырки) с одного узла на другой, J – параметр суперобменного взаимодействия локализованных спинов меди, z – число ближайших соседей. Параметр межузельного кулоновского взаимодействия электронов V обычно считается несущественным в теории магнетизма, и поэтому для краткости его опускают. Однако, в общем случае кулоновское взаимодействие, конечно, важно. В частности, оно, совершенно необходимо для описания спектра плазменных мод и фазовых расслоений в этих системах.

Имеющиеся работы по исследованию двойственного характера магнетизма в переходной области фазовой диаграммы ВТСП можно разделить на две группы. Авторы работ [4-8] и др., стартуют со стороны диэлектрической фазы, когда носителей мало и сверхпроводимость еще не возникает. В работах другой группы [9-12] и др., напротив, исследователи берут в качестве базовой проводящую фазу. Акцент делается на исследование магнитной восприимчивости коллективизированных электронов, когда движение их скоррелировано условием одновременного отсутствия двух носителей на одном и том же узле (нижняя хаббардовская подзона). При этом восприимчивость от локализованных спинов не учитывается.

Постановка задачи. Не все характерные особенности поведения восприимчивости слоистых купратов могут быть объяснены на основе перечисленных двух подходов. В особенности это относится к данным по рассеянию нейтронов. Необходим более последовательный подход, учитывающий влияния подсистем коллективизированных и локализованных спинов друг на друга. Иными словами, расчеты восприимчивости должны быть согласованными и включать в себя вклады обеих систем спинов и зарядов, коррелирующих друг с другом. Этот аргумент и определил направление исследований изложенных в данной диссертации. Основная **цель** диссертации - вывод нового выражения для восприимчивости и апробация его путем сопоставления с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов.

Научная новизна. К новым результатам можно отнести применение нового более строгого подхода к рассмотрению сильнокоррелирующих спиновых и зарядовых систем, итогом которого является новая формула для динамической спиновой восприимчивости электронно- и дырочно-допированных ВТСП с учетом перенормировки параметров зоны проводимости. Данная формула позволила объяснить основные особенности в рассеянии нейтронов в соединениях $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

Научная и практическая значимость результатов исследований. Полученные результаты являются качественно новыми. Они вносят существенный вклад в понимание физических свойств как электронно- так и дырочно- допированных купратов. Разработанная теория спиновой восприимчивости может быть использована при анализе экспериментальных данных и при теоретических исследованиях физических свойств новых материалов, при постановке дипломных и аспирантских работ. Достоверность результатов обеспечена комплексным характером исследований, использованием хорошо зарекомендовавших себя методов в теории сильнокоррелированных электронных систем, непротиворечивостью с результатами полученными другими авторами для частных предельных случаев, соответствием результатов расчетов имеющимся экспериментальным данным.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на международных конференциях и семинарах: “Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости”, ФПС’06, Москва, ФИАН; Euro-Asian Symposium “Magnetism on a Nanoscale” EASTMAG – 2007, Kazan State University; XXXII Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка – 2008», Екатеринбург; “Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости”, ФПС’08, Москва, ФИАН.

Публикации. Основное содержание диссертации опубликовано в двух статьях, а также в четырех расширенных тезисах международных конференций.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Выведена формула для динамической спиновой восприимчивости электронно-допированных ВТСП с учетом перенормировки параметров зоны проводимости за счет спин-спиновых корреляций в ориентации локализованных спинов.
2. Полученная формула позволила объяснить основные особенности неупругого рассеяния нейтронов в сверхпроводнике $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$. В частности, хорошо воспроизводится V-образный рельеф в частотном поведении мнимой части восприимчивости, сдвиг интенсивности рассеяния в область низких частот, а также зависимость положений максимумов поглощения, как функции отношения ω/T .
3. Предложено объяснение, недавно обнаруженной в сверхпроводниках типа $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$, двухпиковой структуре мнимой части спиновой восприимчивости. Низкочастотный пик поглощения находится внутри сверхпроводящей щели и интерпретируется проявлением ветви спиновых экситонов, а высокочастотный, главным образом, соответствует перенормированным коллективным колебаниям локализованных спинов.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка использованной литературы. Диссертация изложена на 82 машинописных страницах, содержит 22 рисунка и список литературы из 61 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

В первой главе излагаются основные особенности строения медно-оксидных ВТСП, как электронно- так и дырочно- допированных, обсуждаются их схожесть и различие. Приводятся необходимые сведения о фазовых диаграммах, зонной структуре, ферми-поверхностях, об экспериментальных данных по рассеянию нейтронов.

Вторая глава посвящена аналитическим вычислениям. В первом параграфе данной главы приведены формулы для спиновой восприимчивости, полученные различными авторами. Сделан анализ по процедурам вывода этих формул, указаны недостатки. Во втором параграфе главы приведен подробный вывод формулы для спиновой восприимчивости в рамках t-J-V-модели.

Гамильтониан t-J-V модели в представлении операторов Хаббарда имеет вид

$$H = H_i + H_J + H_V = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} X_i^{\sigma,0} X_j^{0,\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} \frac{1}{4} J_{ij} (X_i^{\sigma,\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma},\sigma} - X_i^{\sigma,\sigma} X_j^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}}) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} V_{ij} X_i^{0,0} X_j^{0,0}. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое описывает перескоки электронов по узлам двумерной решетки, второе слагаемое – суперобменное взаимодействие спинов, последнее соответствует кулоновскому взаимодействию носителей тока на разных узлах. Под знаками сумм предполагается что $i \neq j$. В формуле (2.5) $X_i^{p,s}$ – операторы Хаббарда, индексы «р» и «s» могут принимать значения 0, σ , $\bar{\sigma}$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\bar{\sigma} = -\sigma$), $X_i^{\sigma,0}$ ($X_i^{0,\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) электронов на узле i со спином σ .

При нахождении уравнения движения для фурье-образа спинового оператора $S_q^+ = \frac{1}{N} \sum_i X_i^{\uparrow,\downarrow} e^{-iqR_i}$ используем технику проекционных операторов. Коммутационные соотношения имеют вид:

$$\{X_i^{0,\uparrow}, X_j^{\uparrow,0}\} = (X_i^{0,0} + X_i^{\uparrow,\uparrow}) \delta_{ij} = [\frac{1+\delta_i}{2} + S_i^z] \delta_{ij}, \quad (2)$$

$$\{X_i^{0,\downarrow}, X_j^{\downarrow,0}\} = (X_i^{0,0} + X_i^{\downarrow,\downarrow}) \delta_{ij} = [\frac{1+\delta_i}{2} - S_i^z] \delta_{ij}. \quad (3)$$

Они получаются при использовании условия полноты $X_i^{0,0} + X_i^{\uparrow,\uparrow} + X_i^{\downarrow,\downarrow} = 1$, соотношений для спиновых операторов $S_i^z = \frac{1}{2}(X_i^{\uparrow,\uparrow} - X_i^{\downarrow,\downarrow})$, $S_i^+ = X_i^{\uparrow,\downarrow}$, $S_i^- = X_i^{\downarrow,\uparrow}$ и плотности носителей в расчете на одну ячейку $X_i^{0,0} = \delta_i$. В частотном представлении для функции Грина $\langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle$ имеем:

$$\omega \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle = \langle\langle [S_q^+, H] | S_{-q}^- \rangle\rangle = -\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \langle\langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle\rangle + \frac{1}{N} \sum_{i,l} J_{il} e^{-iqR_l} \langle\langle (S_i^+ S_i^z - S_i^z S_i^+) | S_{-q}^- \rangle\rangle. \quad (4)$$

Здесь, как и в [11-17] учтено, что дальнего магнитного порядка нет, т.е. $\langle \sum_i S_i^z \rangle = 0$.

Сосредоточим вначале внимание на функции Грина

$$G_{ii}(\omega, q) = -\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \langle\langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle\rangle. \quad (5)$$

Она относится к подсистеме коллективизированных электронов (itinerant). Для ее вычисления рассмотрим произведение операторов

$$X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} = \frac{1}{N} \sum_j X_j^{0,\downarrow} X_i^{\uparrow,0} e^{-i(k+q)R_j} e^{ikR_i}. \quad (6)$$

Видно, что эти операторы удовлетворяют следующему тождеству

$$\sum_k X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} = 0, \quad (7)$$

которое будем использовать в виде

$$\sum_k \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle = 0. \quad (8)$$

Для линейаризации коммутатора $[X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}, H]$ применяем схему расщепления [13], в которой комбинируется приближение случайных фаз и техника проектирования Цванцига-Мори так, чтобы получались результаты RPA в случае простых металлов. Так, например, для произведения операторов в представлении узлов $X_j^{\uparrow,\downarrow} X_l^{0,\uparrow}$ пишем:

$$\begin{aligned} t_{lj} X_j^{\uparrow,\downarrow} X_l^{0,\uparrow} &= t_{lj} (1 - F_l) X_j^{\uparrow,\downarrow} X_l^{0,\uparrow} + t_{lj} F_l X_j^{\uparrow,\downarrow} X_l^{0,\uparrow} = \\ &= t_{lj} (1 - F_l) X_j^{\uparrow,\downarrow} X_l^{0,\uparrow} + \sum_n [\varepsilon_{jl,n}^r X_n^{0,\uparrow} + \Delta_{jl,n}^r X_n^{\downarrow,0}]; \end{aligned} \quad (9)$$

Коэффициенты $\varepsilon_{jl,n}^r$ и $\Delta_{jl,n}^r$ находятся, как и в обычной технике проектирования на подпространство операторов рождения и уничтожения. С физической точки зрения параметр F_l предназначен для сохранения эффектов молекулярного поля со стороны спинов и допированных электронов, а также для обеспечения условия устойчивости. Мнимая часть восприимчивости должна быть положительной. В общем случае, следуя этой схеме, можно ввести три параметра расщепления F_t , F_J и F_V .

Для $T > T_c$, используя данную методику, получаем

$$\begin{aligned} [X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}, (H_t + H_J + H_G)] &= (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} + (1 - F_t) (t_k \langle X_k^{0,\uparrow} X_k^{\uparrow,0} \rangle - \\ &- t_{k+q} \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_{k+q}^{\downarrow,0} \rangle) S_q^+ + \frac{J_q}{2} F_J (\langle X_k^{0,\uparrow} X_k^{\uparrow,0} \rangle - \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_{k+q}^{\downarrow,0} \rangle) S_q^+ - \\ &- \frac{1}{N} \sum_{k'} (\varepsilon_{k'+q} - \varepsilon_{k'}) X_{k'+q}^{0,\downarrow} X_{k'}^{\uparrow,0}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $J_q = 2J_1 \gamma_q = 2J_1 (\cos q_x a + \cos q_y a)$, $t_k = \sum_j t_{lj} e^{ik(R_l - R_j)}$ – фурье-образы

суперобменного взаимодействия и интегралов перескока, соответственно, а

$$\varepsilon_k = \left\{ \sum_l t_{li} \left(\frac{1+\delta}{2} + \frac{2(1+2F_l)}{1+\delta} \langle S_l^z S_i^z \rangle \right) + \sum_l J_{li} (1-F_J) \frac{1}{1+\delta} \langle X_l^{0,\downarrow} X_i^{\downarrow,0} \rangle + \right. \quad (11)$$

$$\left. + \sum_l V_{li} (1-F_V) \frac{2}{1+\delta} \langle X_l^{0,\uparrow} X_i^{\uparrow,0} \rangle \right\} e^{ik(R_i - R_j)}$$

закон дисперсии квазичастиц. Его удобно переписать в виде, типичном для случая сильной связи:

$$\varepsilon_k = 2t_{eff}^{(1)} (\cos k_x a + \cos k_y a) + 4t_{eff}^{(2)} \cos k_x a \cos k_y a + 2t_{eff}^{(3)} (\cos 2k_x a + \cos 2k_y a). \quad (12)$$

Видно, что эффективные параметры зоны определяются следующими формулами:

$$t_{eff}^{(1)} = t_1 \left[P + \frac{1/2 + F_l}{1+\delta} K_1 \right] - \frac{J_1(1-F_J) + 2V_1(1-F_V)}{2N} \sum_{k'} f_{k'} \cos k'_x a,$$

$$t_{eff}^{(2)} = t_2 \left[P + \frac{1/2 + F_l}{1+\delta} K_2 \right] - \frac{V_2(1-F_V)}{N} \sum_{k'} f_{k'} \cos k'_x a \cos k'_y a, \quad (13)$$

$$t_{eff}^{(3)} = t_3 \left[P + \frac{1/2 + F_l}{1+\delta} K_3 \right] - \frac{V_3(1-F_V)}{N} \sum_{k'} f_{k'} \cos 2k'_x a.$$

Расчет спин-спиновых корреляционных функций $K_n = 4\langle S_0^z S_n^z \rangle$ проводится самосогласованно через динамическую спиновую восприимчивость. Описание процедуры расчета приведено в первом параграфе третьей главы диссертации. В процессе расчета проверяется выполнение условия $\langle S_i^+ S_i^- \rangle = \frac{1}{2}(1-\delta)$ (правило сумм). $P = \frac{1+\delta}{2}$, δ – среднее число носителей тока на элементарную ячейку, V_1 , V_2 и V_3 – параметры кулоновского взаимодействия первых, вторых и третьих соседей, соответственно.

Видно, что в формулу (10) вошло слагаемое, которое приводит в последующем к появлению новой функции Грина:

$$D_{ii}(\omega, q) = -\frac{1}{N} \sum_k (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle.$$

Используем (10) для нахождения связи между функциями Грина:

$$\langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle = \frac{i}{2\pi} \chi_{0kq} + [(1-F_l)\pi_{kq} + J_1\gamma_q F_J \chi_{0kq}] \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + \quad (14)$$

$$+ D_{ii}(\omega, q) \zeta_{kq}.$$

Просуммировав по k , и используя условие (8), получаем:

$$D_{ii}(\omega, q) = \left\{ -\frac{i}{2\pi} \chi_0(\omega, q) - \eta(\omega, q) \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle \right\} / \zeta(\omega, q), \quad (15)$$

где

$$\eta(\omega, q) = (1-F_l)\pi(\omega, q) + J_1\gamma_q F_J \chi_0(\omega, q),$$

$$\chi_0(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \chi_{0kq}, \quad \chi_{0kq} = \frac{P(f_k^h - f_{k+q}^h)}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}, \quad (16a)$$

$$\pi(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \pi_{kq}, \quad \pi_{kq} = \frac{P(t_k f_k^h - t_{k+q} f_{k+q}^h)}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}, \quad (16б)$$

$$\zeta(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \zeta_{kq}, \quad \zeta_{kq} = \frac{1}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}. \quad (16в)$$

Здесь $n_k^h = \langle X_k^{0,\sigma} X_k^{\sigma,0} \rangle = P f_k^h$ — числа заполнения, $f_k^h = \{1 + \exp[(\mu - \varepsilon_k)/k_B T]\}^{-1}$ — ферми-функции в дырочном представлении. Это представление является более удобным, так как в родительском соединении купратов, когда носителей тока нет, нижняя хаббардовская зона состояний полностью заполнена.

Продифференцировав (4) по времени еще раз, для фурье-образа функции Грина получаем:

$$\omega^2 \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle\langle [S_q^+, H], S_{-q}^- \rangle\rangle - \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \langle\langle [X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}, H] | S_{-q}^- \rangle\rangle + \\ + \frac{1}{N} \sum_{i,l} J_{il} e^{-iqR_l} \langle\langle [(S_l^+ S_i^z - S_l^z S_i^+), H] | S_{-q}^- \rangle\rangle. \quad (17)$$

Здесь

$$\langle\langle [S_q^+, H], S_{-q}^- \rangle\rangle = -2J_1 K_1 (2 - \gamma_q) + \frac{P}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (f_{k+q}^h - f_k^h), \quad (18)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{i,l} J_{il} e^{-iqR_l} \langle\langle [(S_l^+ S_i^z - S_l^z S_i^+), H] | S_{-q}^- \rangle\rangle = \Omega_q^2 \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle, \quad (19)$$

где $\Omega_q^2 = J_1^2 (2 - \gamma_q) [1 - \delta + 2K_2 + K_3 - K_1 (1 + 2\gamma_q)]$ — квадрат частоты колебаний локализованных спинов при учете лишь трех ближайших соседей. Вспомогательную функцию Грина, входящую в (17), вычисляем, используя те же правила описанные выше

$$-\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \langle\langle [X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}, H] | S_{-q}^- \rangle\rangle = \\ = -\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle\langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle\rangle - \\ - \frac{P}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \left[\left(\frac{J_q}{2} F_J + (1 - F_t) t_k \right) f_k^h - \left(\frac{J_q}{2} F_J + (1 - F_t) t_{k+q} \right) f_{k+q}^h \right] \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle. \quad (20)$$

В последнее выражение вошла новая функция Грина $\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle\langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle\rangle$, которая может быть посчитана на основе выражения (14):

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle = \\
& = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \chi_{0kq} + [(1 - F_t) \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \pi_{kq} + \\
& + J_1 \gamma_q F_J \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \chi_{0kq}] \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + \\
& + D_{it}(\omega, q) \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \zeta_{kq}.
\end{aligned} \tag{21}$$

Решая совместно уравнения (15), (17), (20) и (21) с учетом (18) и (19), делая упрощения вида

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \zeta_{kq} = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \omega) \frac{1}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}} + \\
& + \frac{\omega}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \zeta_{kq} = \frac{\omega}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \zeta_{kq} = \omega \zeta_t(\omega, q),
\end{aligned} \tag{22}$$

приходим к формуле для динамической спиновой восприимчивости

$$\begin{aligned}
\chi_{total}^{+,-}(\omega, q) &= 2\pi i \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle = \\
&= \frac{\omega \chi_0(\omega, q) \zeta_t(\omega, q) - [\omega \chi_t(\omega, q) + 2J_1 K_1 (2 - \gamma_q)] \zeta(\omega, q)}{\omega \eta(\omega, q) \zeta_t(\omega, q) + [\Omega_q^2 - \omega^2 - \omega \eta_t(\omega, q)] \zeta(\omega, q)},
\end{aligned} \tag{23}$$

где

$$\zeta_t(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \zeta_{kq}, \quad \chi_t(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \chi_{kq}, \quad \eta_t(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \eta_{kq}.$$

Обсудим некоторые особенности формулы (23). В отсутствии носителей функции $\chi_t(\omega, q)$, $\eta_t(\omega, q)$ и $\chi_0(\omega, q)$, $\eta(\omega, q)$ обращаются в ноль, а функция $\zeta(\omega, q)$, фигурирующая в числителе и знаменателе (23), сокращается. В результате получается формула

$$\chi_{local}^{+,-}(\omega, q) = \frac{2J_1 K_1 (2 - \gamma_q)}{\omega^2 - \Omega_q^2}, \tag{24}$$

соответствующая двумерному антиферромагнетику. Данная формула совпадает с полученной в [4-8], где имеется её подробное обсуждение и сопоставление с результатами кластерных расчетов.

Далее рассмотрим предел широкой зоны. В этом случае функция $\zeta(\omega, q)$ становится малой, члены с множителями в квадратных скобках могут быть отброшены, а функция $\omega \zeta_t(\omega, q)$ сокращается. Получается следующее выражение

$$\chi_{itinerant}^{+,-}(\omega, q) = \frac{\chi_0(\omega, q)}{(1 - F_t) \pi(\omega, q) + J_1 \gamma_q F_J \chi_0(\omega, q)}. \tag{25}$$

При $F_i = 0$ и $F_j = 1$ оно в точности совпадает в формулой, выведенной в работах [9-12]. По терминологии, принятой в книге [3] – это обобщенная формула RPA для нижней хаббардовской подзоны. Следует, отметить, что формула (25), при $F_i = 0$ иногда, не удовлетворяет условию устойчивости. В частности, как показали наши расчеты, мнимая часть функции (25), при значениях параметров зоны, определенных по данным ARPES и $F_i = 0$, оказывается отрицательной. Допустимые пределы изменения F_i нами согласовывались с условием устойчивости, как в отношении спиновой, так и зарядовой восприимчивостям.

Формула (23) имеет много общего с выражением для восприимчивости, приведенном в работе [7]

$$\chi_{[7]}^{+-}(\omega, q) = \frac{2(\gamma_q - 1)(J_1 K_1 + t F_1 / 2)}{\omega^2 - \omega \Pi(\omega, q) - \Omega_q^2}. \quad (26)$$

Видно, что в (26) отсутствует характерная для коллективизированных электронов функция восприимчивости $\chi_0(\omega, q)$. Аналогичная ситуация и в формуле работы [14]. Это объясняется тем, что использованы разные методы проектирования. При выводе закона дисперсии квазичастиц в [7], как и нашей работе, в качестве скалярного произведения (inner product) используется среднее значение антикоммутаторов. Но, при выводе формулы для спиновой восприимчивости в [7, 14] используются корреляционные функции Кубо. В нашем случае, метод проектирования один и тот же, как при нахождении дисперсии, так и функций восприимчивости.

Отдельно следует остановиться на работах авторов [15], где функция спиновой восприимчивости для нормальной фазы получена в виде (в наших обозначениях):

$$\chi_{+-}(\omega, q) = \frac{\omega \chi_0(\omega, q) + 2J_1 K_1 (2 - \gamma_q) \zeta(\omega, q)}{\omega \eta(\omega, q) + [\omega^2 - \Omega_q^2] \zeta(\omega, q)}. \quad (27)$$

Интересно отметить, что в предположении $\varepsilon_k = P_{eff} t_k$ (такое соотношение выполняется в приближении Хаббард I) формула для восприимчивости, полученная нами, по её структуре может быть преобразована в выражение (27). В нашем случае соотношение $\varepsilon_k = P_{eff} t_k$ не выполняется. Как видно из процедуры вывода формулы для восприимчивости, такое допущение оправдано лишь в пренебрежении спин-спиновыми и другими корреляционными функциями в перенормированном законе дисперсии (11). Кроме того, в нашем случае мы можем провести обобщение формулы (23) на случай сверхпроводящей фазы.

При $T < T_c$ общая схема вывода выражения для восприимчивости остается такой же, но значительно усложняются технические расчеты, часть которых представлена в третьем параграфе второй главы диссертации.

Вообще говоря, так как механизм спаривания носителей заряда в сверхпроводящей фазе остается неизвестным, постановка данной проблемы, может показаться преждевременной. Однако возможен эвристический вариант рассмотрения, основанный на предположении, что операторы рождения и уничтожения квазичастиц в ВТСП являются боголюбовскими. Записав, оператор энергии в боголюбовских операторах в качестве исходного, остается лишь учесть поправочные члены, пропорциональные намагнитченности. Нужно отметить, что в рамках однозонной модели переход к боголюбовским операторам композитного типа не нарушает коммутационных соотношений.

Итак, при $T < T_c$ ищем уравнение движения для оператора $X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}$, выраженного через операторы Боголюбова:

$$X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} = u_{k+q} u_k \alpha_{k+q}^{0,\downarrow} \alpha_k^{\uparrow,0} - u_{k+q} v_k \alpha_{k+q}^{0,\downarrow} \alpha_{-k}^{0,\downarrow} + v_{k+q} u_k \alpha_{-(k+q)}^{\uparrow,0} \alpha_k^{\uparrow,0} - v_{k+q} v_k \alpha_{-(k+q)}^{\uparrow,0} \alpha_{-k}^{0,\downarrow}, \quad (28)$$

$$\text{где } x_k = u_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \right], \quad y_k = v_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \right], \quad z_k = u_k v_k = \frac{\Delta_k}{2E_k},$$

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + |\Delta_k|^2}, \quad \alpha_k^{0,\uparrow} = u_k X_k^{0,\uparrow} - v_k X_{-k}^{\downarrow,0}, \quad \alpha_k^{\downarrow,0} = u_k X_k^{\downarrow,0} + v_k X_{-k}^{0,\uparrow}.$$

Для функций Грина, составленных из операторов Боголюбова, получаем:

$$\begin{aligned} (\omega - E_k + E_{k+q}) \langle \alpha_{k+q}^{0,\downarrow} \alpha_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle &= \frac{i}{2\pi} (u_{k+q} u_k - v_{k+q} v_k) (n_k^h - n_{k+q}^h) + \\ &+ (u_{k+q} u_k - v_{k+q} v_k) \left\{ [F_J \frac{J}{2} + (1 - F_t) t_k] n_k^h - [F_J \frac{J}{2} + (1 - F_t) t_{k+q}] n_{k+q}^h \right\} \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle - \\ &- (u_{k+q} u_k - v_{k+q} v_k) \frac{1}{N} \sum_{k'} (t_{k'+q} - t_{k'}) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} (\omega + E_{-k} + E_{k+q}) \langle \langle \alpha_{k+q}^{0,\downarrow} \alpha_{-k}^{0,\downarrow} | S_{-q}^- \rangle \rangle &= \frac{i}{2\pi} (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) (n_{-k}^h + n_{k+q}^h - P) + \\ &+ (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) \left\{ [F_J \frac{J}{2} + (1 - F_t) t_{k+q}] n_{k+q}^h - \right. \\ &- [F_J \frac{J}{2} + (1 - F_t) t_k] (P - n_{-k}^h) \left. \right\} \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + \\ &+ (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) \frac{1}{N} \sum_{k'} (t_{k'+q} - t_{k'}) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_{k'}^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned}
& (\omega - E_k - E_{-(k+q)}) \langle \langle \alpha_{-(k+q)}^{\uparrow,0} \alpha_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle = \frac{i}{2\pi} (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) (P - n_k^h - n_{-(k+q)}^h) + \\
& + (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) \{ [F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_{k+q}] (P - n_{-(k+q)}^h) - \\
& - [F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_k] n_k^h \} \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + \\
& + (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) \frac{1}{N} \sum_{k'} (t_{k'+q} - t_{k'}) \langle \langle X_{k'+q}^{0,\downarrow} X_{k'}^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle,
\end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned}
& (\omega + E_{-k} - E_{-(k+q)}) \langle \langle \alpha_{-(k+q)}^{\uparrow,0} \alpha_{-k}^{0,\downarrow} | S_{-q}^- \rangle \rangle = \frac{i}{2\pi} (u_{k+q} u_k + v_{k+q} v_k) (n_{-k}^h - n_{-(k+q)}^h) + \\
& + (u_{k+q} u_k + v_{k+q} v_k) \{ [F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_{k+q}] (P - n_{-(k+q)}^h) - \\
& - [F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_k] (P - n_{-k}^h) \} \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + \\
& + (u_{k+q} u_k + v_{k+q} v_k) \frac{1}{N} \sum_{k'} (t_{k'+q} - t_{k'}) \langle \langle X_{k'+q}^{0,\downarrow} X_{k'}^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle.
\end{aligned} \tag{32}$$

В выражениях (29)–(32) числа заполнений вычисляются по правилу $n_k^h = \langle X_k^{0,\uparrow} X_k^{\uparrow,0} \rangle = P \langle (u_k \alpha_k^{0,\uparrow} - v_k \alpha_k^{\downarrow,0}) (u_k \alpha_k^{\uparrow,0} - v_k \alpha_k^{0,\downarrow}) \rangle = u_k^2 P(1 - f_k^h) + v_k^2 P f_k^h$, где $f_k^h = [1 + \exp(-E_k / k_B T)]^{-1}$. Складывая эти четыре уравнения (29)–(32) в соответствии с (28), получаем обобщение выражения (14) на случай сверхпроводящей фазы. Но теперь в нем:

$$\chi_{0kq}(\omega, q) = S_{xx} \frac{P(f_k^h - f_{k+q}^h)}{\omega + E_k - E_{k+q}} + S_{yy} \frac{P(f_{k+q}^h - f_k^h)}{\omega - E_k + E_{k+q}} + \tag{33}$$

$$\begin{aligned}
& + S_{yx}^{(-)} \frac{P(1 - f_k^h - f_{k+q}^h)}{\omega - E_k - E_{k+q}} + S_{xy}^{(+)} \frac{P(f_k^h + f_{k+q}^h - 1)}{\omega + E_k + E_{k+q}}, \\
& \pi_{kq}(\omega, q) = S_{xx} \frac{P(t_k f_k^h - t_{k+q} f_{k+q}^h)}{\omega + E_k - E_{k+q}} + S_{yx}^{(-)} \frac{P(t_k(1 - f_k^h) - t_{k+q} f_{k+q}^h)}{\omega - E_k - E_{k+q}} + \tag{34}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + S_{xy}^{(+)} \frac{P(t_k f_k^h - t_{k+q}(1 - f_{k+q}^h))}{\omega + E_k + E_{k+q}} + S_{yy} \frac{P(t_k(1 - f_k^h) - t_{k+q}(1 - f_{k+q}^h))}{\omega - E_k + E_{k+q}},
\end{aligned}$$

$$\zeta_{kq}(\omega, q) = \frac{S_{xx}}{\omega + E_k - E_{k+q}} + \frac{S_{yx}^{(-)}}{\omega - E_k - E_{k+q}} + \frac{S_{xy}^{(+)}}{\omega + E_k + E_{k+q}} + \frac{S_{yy}}{\omega - E_k + E_{k+q}}. \tag{35}$$

Здесь для сокращения записи введены факторы когерентности:

$$S_{xx} = x_k x_{k+q} + z_k z_{k+q}, \quad S_{yy} = y_k y_{k+q} + z_k z_{k+q},$$

$$S_{xy}^{(+)} = x_k y_{k+q} - z_k z_{k+q}, \quad S_{yx}^{(-)} = y_k x_{k+q} - z_k z_{k+q}.$$

Вид формул (17), (18), (20), (21) в сверхпроводящей фазе несколько изменяется, в них необходимо сделать формальную замену ε_k на E_k и иметь ввиду изменение функций (16 а–в) на (33)–(35). Кроме того, во всех уравнениях нужно учитывать (28). При всем этом формула для спиновой восприимчивости будет иметь такой же вид, как и (23), но теперь в ней функции $\zeta(\omega, q)$, $\chi_0(\omega, q)$, $\pi(\omega, q)$, $\zeta_i(\omega, q)$, $\chi_i(\omega, q)$, $\pi_i(\omega, q)$, $\eta_i(\omega, q) = F_j J_{1j} \gamma_q \chi_i(\omega, q) + (1 - F_i) \pi_i(\omega, q)$ определяются выражениями (33)–(35).

В последнем параграфе второй главы представлена процедура вывода выражения для зарядовой восприимчивости с использованием описанного метода проектирования. Полученное выражение для зарядовой восприимчивости использовалась нами для проверки условия устойчивости. Мнимая часть зарядовой восприимчивости, так же как и спиновой, должна быть положительной.

В **третьей главе** диссертации представлены результаты численных расчетов по полученным формулам. В первом параграфе данной главы представлена процедура вычислений спин-спиновых корреляционных функций. Расчет спин-спиновых корреляционных функций проводится самосогласованно через мнимую часть спиновой восприимчивости

$$\langle S_i^- S_j^+ \rangle = \frac{1}{\pi} \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \iiint cth \left(\frac{\beta \omega}{2} \right) \text{Im} \chi^{+, -}(q, \omega) e^{iqR_{ij}} d\omega dq_x dq_y. \quad (36)$$

Отметим, что при равенстве индексов левая часть (36) должна быть равна $\langle S_i^- S_i^+ \rangle = 1/2(1 - \delta)$, а не просто 1/2 как в [15].

Во втором параграфе данной главы представлены результаты численных расчетов и их сопоставление с данными по неупругому рассеянию нейтронов в сверхпроводнике $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$.

В экспериментах, представленных в работе [16], ярко выделяются две особенности. Первая – в сверхпроводящем состоянии мнимая часть спиновой восприимчивости имеет резкий пик на низких энергиях (рис.1а). Вторая – по мере увеличения энергии нейтронов пик в интенсивности рассеяния раздваивается, образуя V-образную форму около волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$, напоминая сильно ослабленное магннное рассеяние в родительском соединении La_2CuO_4 (рис.1б).

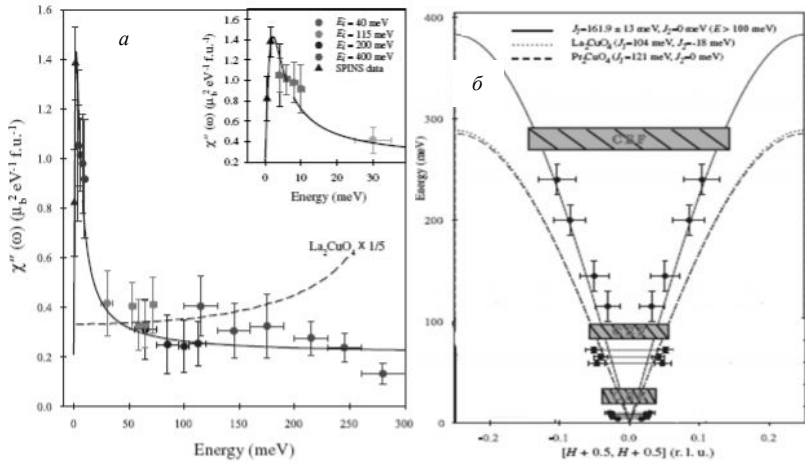


Рис.1. Результаты нейтронного рассеяния на соединении $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ по работе [16]. а) Зависимость мнимой части восприимчивости от энергии нейтронов. На вставке представлена низкочастотная зависимость. Штриховой линией показано частотное поведение спиновой восприимчивости в родительском соединении La_2CuO_4 . б) Дисперсия спиновых возбуждений: штриховая линия в Pr_2CuO_4 , точки в La_2CuO_4 , сплошная – эксперимент в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$. Заштрихованные прямоугольники соответствуют положению штарковских подуровней основного мультиплета Pr^{3+} в кристаллическом поле.

Явление сверхпроводимости очевидно связано с коллективизированными электронами, магнанные же моды свидетельствуют о наличии локализованных моментов. Авторы [16] здесь же приводят данные по рассеянию нейтронов в родительском соединении La_2CuO_4 , показанные на рис. 1 штриховыми линиями. По мнению авторов, совершенно непонятным является тот факт, что пик в рассеянии нейтронов у родительского соединения находится в области высоких частот, а по мере допирования и перехода в сверхпроводящую фазу он оказывается в области низких энергий. Кроме того, экспериментальная (сплошная) линия дисперсии находится внутри дисперсионной линии магнанных мод (штриховая линия) родительского соединения La_2CuO_4 . Это обстоятельство авторы интерпретировали как эффективное увеличение интеграла обменного взаимодействия J_1 с ростом допирования. Однако, этот вывод находится в прямом противоречии со сложившимися представлениями. Так, в обзоре [17] особенно резко подчеркнуто, что по мере допирования величина обменного взаимодействия не растет, а уменьшается.

В наших численных расчетах эффективные параметры зоны брались в соответствии с экспериментально наблюдаемой поверхностью Ферми [18] (в мэВ): $t_{\text{eff}}^{(1)}=270$, $t_{\text{eff}}^{(2)}=-108$, $t_{\text{eff}}^{(3)}=27$. Самосогласованные по форму-

лам (13) параметры гамильтониана оказались равными (в мэВ): $t_1=473$, $t_2=-136.1$, $t_3=34.7$, $\mu=50$.

Квадрат частоты локализованных спинов на узлах меди в отсутствие носителей тока для простоты брался, как и в [7] $\Omega_q^2 = 2J_1^2 \alpha |K_1| (2 - \gamma_q)(2\Delta + 2 + \gamma_q)$. Здесь, в результате самосогласования, были найдены $K_1 = 4\langle S_0^z S_1^z \rangle = -0.4$ – спин-спиновая корреляционная функция первых соседей, $\alpha = 1.5$ – параметр расщепления, $\Delta = 5 \cdot 10^{-4}$ – параметр спиновой щели. Для численных оценок бралось значение $J_1=140$ мэВ, т.е. как в родительском соединении La_2CuO_4 , а зависимость сверхпроводящей щели от волнового вектора задавалась в соответствии с экспериментальными данными [19], т.е. $\Delta_k = \Delta_1 (\cos k_x a - \cos k_y a) + \Delta_4 (\cos 3k_x a - \cos 3k_y a)$ (в мэВ): $\Delta_1=3.9$ и $\Delta_4=-2.0$. Параметры расщепления F_x , F_y и F_z брались соответственно 0.65, 1 и 1. Эти значения согласовывались с условием положительности мнимой части спиновой и зарядовой восприимчивостей.

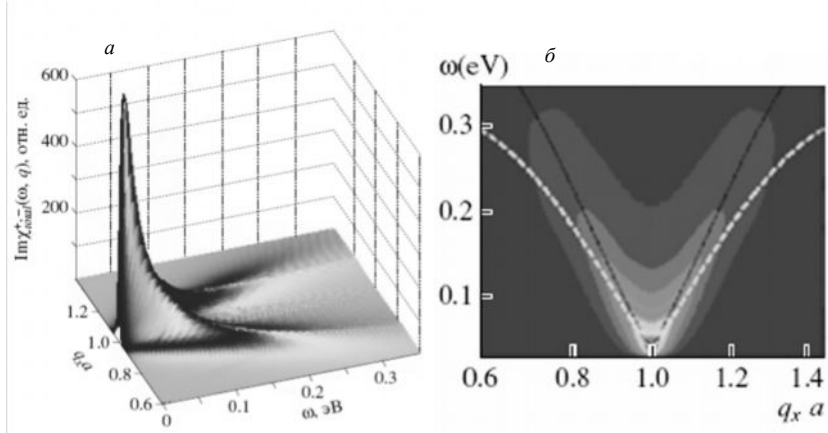


Рис.2. а) Мнимая часть спиновой восприимчивости сверхпроводника $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ рассчитанная по формуле (23) при $T=10$ К, как функция энергии и волнового вектора $q_x a$ падающих нейтронов (в единицах π) при $q_x = q_y$.

б) Вид сверху на трехмерный график мнимой части восприимчивости, как функции энергии (в эВ) и волнового вектора $q_x a = q_y a$ нейтронов (в единицах π). Пунктирная белая линия соответствует энергии колебаний локальных спинов Ω_q в отсутствие электронов проводимости, тонкая черная – огибающая максимумов $\text{Im} \chi_{\text{total}}^{+-}(\omega, q)$.

Результаты численного расчета мнимой части спиновой восприимчивости для $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ при использовании значения $P=0.7$ –

параметра заполнения зоны и температуре $T=10$ К представлены на рисунке 2. Видно, что на волновом векторе $Q = (\pi, \pi)$, в низкочастотной области имеется хорошо выраженный пик, в соответствии с данными эксперимента [16]. Расходящийся V-рельеф напоминает соответствующий рельеф в родительском соединении La_2CuO_4 , обусловленный маглонной модой. Как показали наши расчеты, в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ эта мода существенно подавлена из-за сильной связи локализованных и коллективизированных спинов. Интересно сравнить крутизну V-рельефа с той, которая определялась бы только колебаниями локальных спинов. Для этой цели, на рисунке 2б приведен расчет по формуле Ω_q для высокочастотной части (пунктирные белые линии), здесь же тонкой черной линией показаны максимумы V-рельефа. Видно, что V-рельеф находится внутри пунктирных границ.

Таким образом, наши исследования показывают, что увеличение обменного интеграла в данном соединении $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ является лишь кажущимся. Основная причина данного эффекта заключена во взаимном влиянии систем локализованных и коллективизированных электронов.

Другим важным экспериментальным фактом, обнаруженным в исследованиях по рассеянию нейтронов [20], является так называемая скейлинговая зависимость. Причина столь универсальной зависимости (скейлинг) до наших исследований не имела объяснения. Авторы [20] указывают на то, что теоретическое воспроизведение этой зависимости является хорошим пунктом проверки теории.

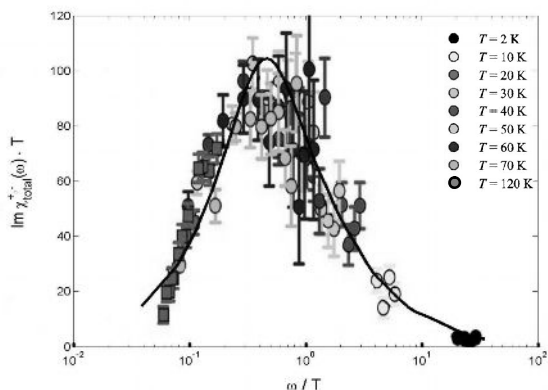


Рис.3. Скейлинговое поведение мнимой части восприимчивости помноженной на температуру в зависимости от отношения энергии нейтронов к температуре в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$. Символы с указанием погрешности измерений согласно работе [20], сплошная линия – расчет по формуле (23).

На рисунке 3, с использованием этих же параметров расчета, показано скейлинговое поведение мнимой части спиновой восприимчивости помноженной на температуру в зависимости от отношения энергии падающих нейтронов к температуре в нормальной и в сверхпроводящей фазах. Как и в работе [8] считалось, что параметр затухания Γ пропорционален температуре: $\Gamma = \beta \cdot T$, где $\beta = \frac{1}{3} \cdot 10^{-4} \frac{\text{эВ}}{\text{К}}$. Видно, что наш

расчет воспроизводит особенности в частотно-температурной зависимости рассеяния нейтронов в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$.

В качестве еще одного примера применения развитой теории в третьем параграфе данной главы анализируются новые данные по рассеянию нейтронов в сверхпроводниках типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Соединение $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ относится к группе сверхпроводников дырочного типа. Носители тока распределены по позициям кислорода. Имеется сильное обменное взаимодействие дырок кислорода с локализованными спинами ионов меди. Это обменное взаимодействие приводит к образованию синглетной и триплетной подзон. Нижним по энергии является синглетное состояние. В пренебрежении триплетными медь-кислородными состояниями максимально упрощенный исходный гамильтониан дырочных ВТСП имеет вид [13]

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \psi_i^{\sigma,pd} \psi_j^{pd,\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} \frac{1}{4} J_{ij} (\psi_i^{\sigma,\bar{\sigma}} \bar{\psi}_j^{\bar{\sigma},\sigma} - \psi_i^{\sigma,\sigma} \bar{\psi}_j^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}}) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} V_{ij} \psi_i^{pd,pd} \psi_j^{pd,pd}. \quad (37)$$

Здесь $\psi_i^{pd,\sigma} (\bar{\psi}_j^{\sigma,pd})$ – операторы рождения (уничтожения) композитных квазичастиц в зоне проводимости. Например, оператор $\psi_i^{pd,\uparrow}$ приближенно записывается в виде $\psi_i^{pd,\uparrow} \approx [X_i^{\uparrow,\downarrow} P_i^{\uparrow,0} - X_i^{\uparrow,\uparrow} P_i^{\downarrow,0}] / \sqrt{2}$, где $X_i^{p,q}$ и $P_i^{p,q}$ – хаббардовские операторы, относящиеся к d-дыркам Cu^{2+} и р-дыркам O^{1-} , соответственно. Формально оператор энергии (38) можно получить из (1) преобразованием $X^{0,\uparrow} \rightarrow \psi^{pd,\downarrow}$, $X^{0,\downarrow} \rightarrow -\psi^{pd,\uparrow}$, $X_i^{0,0} \rightarrow \psi_i^{pd,pd}$ и сменой знака у интеграла перескока, т.е. $t_{ij} \rightarrow -t_{ji}$. Легко проверить, что функции $\chi_0(\omega, q)$ и $\zeta(\omega, q)$ инвариантны относительно этого преобразования. Однако, что следует подчеркнуть, при данном преобразовании функция $\pi(\omega, q)$ меняет знак.

С учетом этих преобразований, формула (23) может быть использована и для анализа магнитной восприимчивости $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Во избежание недоразумений нужно отметить, что указанное преобразование следует отличать от стандартного преобразования электрон-дырка в

пределах состояний одной зоны проводимости. Сейчас речь идет о свойствах симметрии между формулами для восприимчивостей из разных зон, а именно между хаббардовскими подзонами нижнего и верхнего типа.

Недавние эксперименты [21, 22] на $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ и $\text{La}_{1.90}\text{Sr}_{0.10}\text{CuO}_4$ показали, что в интенсивности неупругого рассеяния нейтронов имеется не один (как ранее считалось), а два пика (см. рис. 4а). Один из них (низкочастотный) наиболее четко выражен в сверхпроводящей фазе. В образцах, соответствующих оптимальному допированию ($x=0.16$), он расположен на энергиях порядка 18 мэВ. Ни одна из существующих теорий спиновой восприимчивости, как подчеркивается в работе [22], не может объяснить факт одновременного наблюдения указанных пиков.

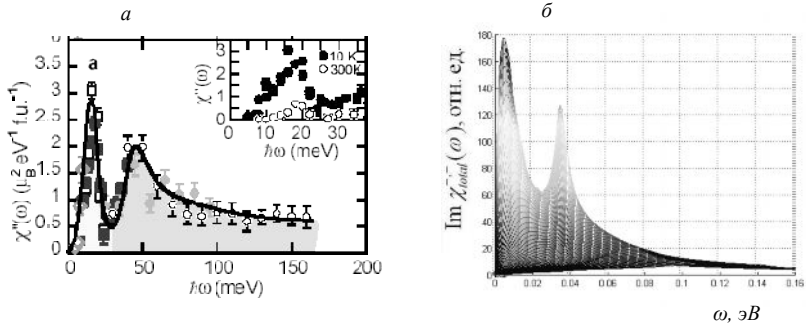


Рис.4. а) Двухпиковая структура мнимой части спиновой восприимчивости по данным нейтронных исследований соединения $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ [21] при $T < T_c$. На вставке показано формирование низкочастотного пика при переходе из нормальной в сверхпроводящую фазу.

б) Результаты численных расчетов мнимой части восприимчивости для сверхпроводника $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$, по оси абсцисс отложена энергия нейтронов в эВ, по оси ординат мнимая часть восприимчивости (в от. ед.).

Результаты численных расчетов мнимой части восприимчивости для $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ в сверхпроводящей фазе изображены на рисунке 4б. Форма ферми-поверхности задавалась в соответствии с данными работы [23]. Эффективные интегралы перескока равны $t_{\text{eff}}^{(1)}=250$, $t_{\text{eff}}^{(2)}=-37.5$, $t_{\text{eff}}^{(3)}=18.75$ (в мэВ). Использовались следующие параметры: суперобменное взаимодействие $J_1=0.13$ эВ, параметр затухания $\Gamma=0.003$ эВ, параметр щели $\Delta_1=0.01$ эВ в $\Delta_k = \Delta_1(\cos k_x a - \cos k_y a)$. Расчеты производились с использованием формулы $\Omega_q^2 = J_1^2(2 - \gamma_q)[1 - \delta + 2K_2 + K_3 - K_1(1 + 2\gamma_q)]$ для квадрата частоты колебаний локализованных спинов. В результате согласования были найдены следующие значения корреляционных

функций: $K_1=-0.424$; $K_2=0.178$; $K_3=K_2$; параметры расщеплений при этом получились $F_t=0.01$; $F_r=0.80$; $F_l=1$, число носителей тока в расчете на элементарную ячейку $\delta=0.25$ и, соответственно, $P=0.6250$, химпотенциал $\mu=202.5$ мэВ.

Из сравнений рисунков 4 а и б видно, что наш расчет воспроизводит двухпиковую структуру интенсивности рассеяния нейтронов в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Нижний пик находится внутри энергетического интервала, соответствующего сверхпроводящей щели. Его не будет, если обратить в ноль функции $\eta(\omega, q)$ и $\eta_i(\omega, q)$ в знаменателе (23), что соответствует отключению корреляций в движении коллективизированных дырок. Интересно отметить при этом, что функция $\zeta(\omega, q)$, стоящая перед частотами колебаний локализованных спинов, блокирует их проявление. Из-за когерентных факторов в функции $\zeta(\omega, q)$, вклад в восприимчивость локализованных колебаний выталкивается в сторону высоких частот, за энергетическую щель. Или, иными словами, восприимчивость на низких частотах "вымерзает".

Таким образом, происхождение нижнего пика, как и в рамках приближения RPA, может быть интерпретировано как проявление коллективных спиновых колебаний внутри сверхпроводящей щели (по терминологии [24], спиновых экситонов). Дисперсия же высокочастотного пика около волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$ напоминает магннное рассеяние в двумерной системе локализованных спинов с сильными антиферромагнитными корреляциями. Причем эти колебания существенно перенормированы из-за связи с коллективизированными электронами. Рельеф высокочастотного пика похож на V-образный рельеф, изображенный на рисунке 2, однако, в случае $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ его положение существенно сдвинуто в сторону высоких частот. Причина этого сдвига становится понятной, если учесть, что эффективный радиус носителей тока (дырки кислорода синглетным образом скоррелированные со спином меди) значительно больше, нежели в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$, где носители распределены по позициям меди. В последнем случае возмущение антиферромагнитных корреляций слабее и параметр спиновой щели Δ_1 меньше, нежели в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

Основные выводы диссертационного исследования:

Проведенное сопоставление результатов численных расчетов с экспериментом показывает, что выведенное выражение для динамической спиновой восприимчивости с учетом перенормировки параметров зоны проводимости за счет спин-спиновых корреляций в ориентации локализованных спинов позволяет описать обнаруженные недавно особенности в рассеянии нейтронов в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ и в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. В ча-

стности хорошо воспроизводится V-образный рельеф в частотном поведении мнимой части восприимчивости, сдвиг интенсивности рассеяния в область низких частот, а также скейлинговое поведение восприимчивости. Предложено так же объяснение, недавно обнаруженной в сверхпроводниках типа $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$, двухпиковой структуре мнимой части спиновой восприимчивости. Магнетизм электронных и дырочных ВТСП является двойственным. С одной стороны в них имеются носители тока, а с другой – локализованные спины на подрешетке ионов меди. Обе эти подсистемы настолько сильно переплетены между собой, что мода коллективных колебаний является общей.

Материалы диссертации представлены в следующих публикациях:

1. Ерёмин М.В. К теории неупругого рассеяния нейтронов в сверхпроводнике $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ / М.В. Ерёмин, А.И. Андреев, И.М. Ерёмин // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2007. – Т.86. – С.386-389.
2. Андреев А.И. К теории динамической спиновой восприимчивости в рамках t-J-V-модели. Сопоставление с данными по рассеянию нейтронов в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ / А.И. Андреев, М.В. Ерёмин, И.М. Ерёмин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2009. – Т.135. – С.65-76.
3. Андреев А.И. Спиновая динамика t-J модели. Взаимосвязь восприимчивостей коллективизированных и локализованных электронов / А.И. Андреев, И. Ерёмин, М.В. Ерёмин // Сборник трудов “Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости”, ФПС’06, Москва, ФИАН, 2006. – С.36-37.
4. Eremin M. Toward the Theory of Neutron Scattering in $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ / M. Eremin, A.I. Andreev, I. Eremin // Euro-Asian Symposium “Magnetism on a Nanoscale” EASTMAG – 2007, Kazan State University, 2007. – p.155.
5. Андреев А.И. О происхождении пиков нейтронного рассеяния в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ / А.И. Андреев, М.В. Ерёмин, И.М. Ерёмин // XXXII Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка – 2008», Тезисы докладов, Екатеринбург, 2008 – С.22.
6. Андреев А.И. О скейлинге в частотной зависимости рассеяния нейтронов $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ и двухпиковой структуре в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ / А.И. Андреев, И. Ерёмин, М.В. Ерёмин // Сборник трудов “Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости”, ФПС’08, Москва, ФИАН, 2008. –С.48-49.

Список цитируемой литературы:

1. Плакида Н.М. Высокотемпературные сверхпроводники / Н.М. Плакида – М: Международная программа образования, 1996. – 288 с.
2. Вальков В.В. Квазичастицы в сильно коррелированных системах / В.В. Вальков, С.Г. Овчинников – Новосибирск: Издательство СО РАН, 2001. – 277 с.
3. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Базовые модели в квантовой теории магнетизма / Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин – Екатеринбург: Издательство УрО РАН, 2002. – 260 с.
4. Shimahara H. Fragility of the Antiferromagnetic Long-Range-Order and Spin Correlation in the Two-Dimensional t-J Model / H. Shimahara, S. Takada // Journal of The Physical Society of Japan. – 1992. – V.61. – pp.989-997.
5. Winterfeld S. Theory of magnetic short-range order in the t-J model / S. Winterfeld, D. Ihle // Physical Review B. – 1998. – V.58. – p.9402.
6. Джакели Г. Динамическая спиновая восприимчивость в t-J-модели / Г. Джакели, Н.М. Плакида // Теоретическая и математическая физика. – 1998. – Т.114. – С.426-438.
7. Sherman A. Evolution of the hole and spin-excitation spectra of the two-dimensional t-J model: From light to heavy doping / A. Sherman // Physical Review B. – 2004. – V.70. – p.184512.
8. Михеенков А.В. Спиновая восприимчивость купратов в рамках модели двумерного фрустрированного антиферромагнетика. Роль перенормировок спиновых флуктуаций для описания нейтронных экспериментов / А.В. Михеенков, А.Ф. Барабанов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2007. – Т.132. – С.392-495.
9. Hubbard J. Generalized spin susceptibility in the correlated narrow-energy-band model / J. Hubbard and K.P. Jain // J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.). – 1968. – Ser.2, V.1. – pp.1650 - 1657.
10. Yushankhai V.Yu. Dynamic spin susceptibility in the t-J model near to the localized limit / V.Yu. Yushankhai, R. Hayn and D. Ihle // Dubna preprint. – 1996. – pp.1-28.
11. Кузьмин Е.В. Проблема основного состояния в модели Хаббарда при $U=\infty$ / Е.В. Кузьмин // Физика твердого тела. – 1997. – Т.39. – С.193-203.
12. Auslender M.I. Itinerant electron ferromagnetism in narrow energy bands / M.I. Auslender, V.Yu. Irkhin and M.I. Katsnelson // J. Phys. C (Solid State Phys.). – 1988. – V.21. – pp.5521-5537.
13. Ерёмин М.В. Динамическая спиновая восприимчивость дырочных ВТСП в модели синглетно-коррелированной зоны / М.В. Ерёмин,

- А.А. Алеев, И.М. Ерёмин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2008. – Т.133. – С.862-874.
14. Sega I. Double dispersion of the magnetic resonant mode in cuprates from the memory function approach / I. Sega, P. Prelovsek // Physical Review B. – 2006. – V.73. – p.092516.
 15. Zavidonov A.Yu. Evolution of antiferromagnetic short-range order with doping in high- T_c superconductors / A.Yu. Zavidonov, D. Brinkmann // Physical Review B. – 1998. – V.58. – pp.12486-12494.
 16. Wilson Stephen D. High-Energy Spin Excitations in the Electron-Doped Superconductor $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-\delta}$ with $T_c=21$ K / Stephen D. Wilson et. al. // Physical Review Letters. – 2006. – V.96. – p.157001.
 17. Barzykin V. Universal Behavior and the Two-component Character of Magnetically Underdoped Cuprate Superconductors / V. Barzykin and D. Pines // cond-mat 0903.1835v1. – 2009.
 18. Ismer J.P. Magnetic Resonance in the Spin Excitation Spectrum of Electron-Doped Cuprate Superconductors / J.P. Ismer, I. Eremin, E. Rossi, and D.K. Morr // Physical Review Letters. – 2007. – V.99. – p.047005.
 19. Blumberg G. Nonmonotonic $d_{x^2-y^2}$ Superconducting Order Parameter $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ / G. Blumberg et. al. // Physical Review Letters. – 2002. – V. 88. – p.107002.
 20. Wilson Stephen D. Evolution of low-energy spin dynamics in the electron-doped high-transition-temperature superconductor $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-\delta}$ / Stephen D. Wilson et. al. // Physical Review B. – 2006 – V.74. – p.144514.
 21. Vignole B. Two energy scales in the spin excitations of the high- T_c superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ / B. Vignole et. al. // Nature Phys. – 2007. – V.3. – p.163.
 22. Kofu M. Dispersion and energy spectrum of spin excitations in an underdoped $\text{La}_{1.90}\text{Sr}_{0.10}\text{CuO}_4$ / M. Kofu, T. Yokoo, F. Trouw and K. Yamada // cond-mat 0710.5766v1. – 2007.
 23. Yoshida T. Low-energy electronic structure of the high- T_c cuprates $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ studied by angle-resolved photoemission spectroscopy / T. Yoshida et. al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2007. – V.19. – p.125209.
 24. Eremin I. Novel neutron resonance mode in $d_{x^2-y^2}$ -wave superconductors / I. Eremin et. al. // Physical Review Letters. – 2005. – V.94. – p.147001.

Подписано в печать _____ 2009. Формат 60×84/16.

Уч.-изд.л. 1,39. Усл. печ.л. 1,5.

Тираж 100. Заказ №.

Оригинал-макет отпечатан ООП Марийского государственного университета
424001, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1